

# Atmospheric Water Vapour Sensing by means of Differential Absorption Spectrometry using Solar and Lunar Radiation

**Doctoral Thesis****Author(s):**

Münch, Stefan Walter

**Publication date:**

2013

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010006561>

**Rights / license:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Diss. ETH No. 21491

ATMOSPHERIC WATER VAPOUR SENSING  
BY MEANS OF  
DIFFERENTIAL ABSORPTION SPECTROMETRY  
USING SOLAR AND LUNAR RADIATION

A dissertation submitted to the

ETH ZURICH

for the degree of

Doctor of Sciences

presented by

STEFAN WALTER MÜNCH

Dipl. Geomatik-Ing. ETH

born 5 July, 1981

citizen of Zürich ZH

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. M. Rothacher, examiner

Dr. St. Florek, co-examiner

Dr. B. Bürki, co-examiner

Prof. Dr. A. Geiger co-examiner

Prof. Dr. G. Elgered, co-examiner

2013

# ABSTRACT

Tropospheric water vapour plays a crucial role in the understanding of a variety of different atmospheric processes, ranging from local weather phenomena to global climate change. Regarding satellite geodesy, water vapour acts as disturbing factor for various measurement methods, causing path delays of radio signals and consequently leads to considerable biases in the measurement results. The spatial and temporal concentration distribution can hardly be modelled and therefore has to be determined instrumentally to correct the influence computationally.

The application of the principle of “Differential Optical Absorption Spectroscopy” (DOAS) using the sun as radiation source to locally determine integrated water vapour concentrations (PW), has proven itself as a very potent methodology, with good relative and absolute accuracy, high temporal resolution and comparably low calibration efforts. It also seems especially well suited for validation purposes for independent measurement methods.

The intention of the presented project is to implement the findings from the development of earlier prototype instruments and to contemplate several further aspects related with the DOAS approach to determine atmospheric water vapour: Improved temporal coverage of the measurement method through inclusion of night time measurements with the help of moonlight, which are enabled by means of a massively increased system sensitivity to deal with the up to six orders of magnitude lower intensity of the background radiation with respect to solar measurements. Further it is to investigate, how reliable acquisitions of sun transmission spectra can be achieved, when deploying the system on moving platforms, for possible future validation measurements of satellite-borne radiometer data on satellite ground tracks on the open sea. The prototype instruments developed should particularly feature high field versatility, requiring eased transportability, resistance to weather and not least the possibility of a fully automatic measurement procedure, including instrument self-calibration.

For this purpose two identically constructed compact measurement systems were built. The instruments dispose of a custom-built telescope (heliostat principle) and an optically directly coupled spectrometer unit. The whole system is enclosed in a rugged aluminium hull, including most of the steering electronics. The motorized telescope is able to follow the moving light source fully autonomously, also with the platform moderately moving. A quasi-monochromator with an echelle grating as main dispersion element is used as spectrometer unit, allowing a compact architecture, a great spectral resolution and efficiency at the same time. Together with a back-thinned CCD detector highly resolved images of water vapour absorption lines can be obtained. The primary wavelength range lies between 789 nm and 802 nm, the reciprocal linear dispersion amounts to 7.3 pm/px at a focal length of just 400 mm. A motorized deflection mirror in the spectrometer allows the observation of adjacent spectral windows and serves for the highly precise position stabilization of the spectrum on the CCD sensor.

Test measurements with the sun and the moon as background radiation source show the extraordinarily high system light throughput and the high spectral resolving power of the apparatus. However illumination dependent interference structures on the detector (etaloning) prevent the deduction of usable transmission spectra from the measured raw data. For that reason a variety of optical measures to homogenize the radiation entering the spectrometer with respect to field and aperture are examined. As a feasible solution, with sufficient radiation distribution and a still acceptable intensity attenuation, a short quartz light guiding fibre with a hexagonal cross section has been found and implemented.

For instrumental control a software package has been developed, which autonomously handles the measurement process including the various calibration processes and the interaction of the various sensors and actuators. Additionally a variety of algorithms have been provided, helping to eliminate various defective influences in the raw data, as the correction of stray and false light portions or the elimination of interspersed beat structures in lunar spectra. Furthermore procedures which serve in spectrum processing have been supplied, as for the computation of a holistic intensity baseline or the

---

dynamic determination of apparatus profiles. For the determination of the water vapour concentrations from the measured spectroscopic data established computational procedures could be used mostly.

Various available spectroscopic databases have been analysed regarding the suitability of the listed absorption line parameters for the deduction of reliable water vapour concentrations. Comparison between the two identically built solar spectrometers yield considerable deviations of up to  $1.5 \text{ kg/m}^2$  in the zenith integral concentrations which are presumably ascribable to systematic influences likely caused by unrecognised stray light influence. The mean value of the stochastic deviations amounts to about 1.1 % of the slant PW concentration. The cross-comparison with an independent measurement method, in this case GPS meteorology, however also shows significant divergences and thus point to the various further systematic effects which have to be examined more closely, as e.g. the uncertainty of the published spectroscopic parameters regarding line strength and line broadening as well as the baseline determination in the measured spectra.

Despite the considerable sensitivity losses with respect to the originally planned design due to beam homogenization, the methodology has been successfully applied to lunar measurements, albeit with reduced accuracy as stated in stochastic appraisals and with considerably lower temporal resolution.

The project presented here confirms and clarifies the possibilities of the application of DOAS for ground-based remote sensing of integral water vapour concentrations, but also gives clear indication on the different systematic biases which have to be examined more closely, e.g. regarding the accuracy of the spectroscopic parameters (both, for line strength and line broadening), as well as the determination procedure of the baseline in the measured spectra. This work also points out the chances as well as the serious difficulties which arise from the design, construction and deployment of highly integrated DOAS spectrometers of high performance. Regarding the application of various optical components and detectors for the development of similar instruments valuable insights have been gathered.

# ZUSAMMENFASSUNG

Troposphärischer Wasserdampf spielt als Einflussgrösse eine wichtige Rolle für das Verständnis einer Vielzahl atmosphärischer Vorgänge, von lokalen Wetterphänomenen bis hin zum globalen Klimawandel. Im Bereich der Satellitengeodäsie tritt Wasserdampf als schwer modellierbarer Störfaktor in Erscheinung, der bei verschiedenen Messsystemen Fehler durch Laufzeitverzögerungen von Radiosignalen verursacht. Die Störgrösse muss instrumentell bestimmt werden, um den Einfluss rechnerisch zu eliminieren.

Die Anwendung des Prinzips der *Differentiellen Optischen Absorptionsspektroskopie* (DOAS) mit Hilfe der Sonne als Hintergrundstrahler zur lokalen Bestimmung von integralen Wasserdampfkonzentrationen (PW) hat sich in der Vergangenheit als äusserst wirksamer Ansatz erwiesen, dies mit guter relativer und absoluter Genauigkeit bei gleichzeitig hoher zeitlicher Auflösung und verbunden mit einem vergleichsweise geringen Kalibrationsaufwand. Insbesondere auch als Validierungsmethode unabhängiger Messverfahren scheint diese Methode hervorragend geeignet zu sein.

Die Intention des vorliegenden Projektes liegt in der Umsetzung der Erkenntnisse, welche aus der früheren Entwicklung von Geräteprototypen gewonnen wurden und in der genaueren Untersuchung weiterer Aspekte der DOAS Methodik zur Wasserdampfbestimmung: Verbesserung der zeitlichen Einsatzfähigkeit der Messmethode durch Ermöglichung von Nachtmessungen mithilfe von Mondlicht, dies durch eine massive Verbesserung der Instrumentensensitivität, um im Vergleich zu Sonnenmessungen mit bis zu sechs Grössenordnungen schwächeren Intensitäten umgehen zu können. Weiter soll untersucht werden, wie eine zuverlässige Erfassung von Sonnentransmissionsspektren auf einer bewegten Plattform durchzuführen ist, zur möglichen Validierung von satellitengestützten Radiometermessungen auf Satelliten-Groundtracks auf offener See. Die zu entwickelnden Prototypen sollen sich insbesondere auch durch einfache Einsetzbarkeit im Feld auszeichnen, was neben einer erleichterten Transportfähigkeit und Witterungsbeständigkeit nicht zuletzt die Möglichkeit eines vollautomatisierten Messablaufs, inklusive Geräteselbstkalibrierung, umfasst.

Zu diesem Zweck wurden zwei baugleiche kompakte Messsysteme erstellt. Die Geräte verfügen über ein spezifisch für diese Aufgabe entwickeltes Teleskop (Heliostat-Prinzip) und ein optisch direkt angekoppeltes Spektrometer. Die gesamte Messeinheit ist wetterfest in einer robusten Aluminiumhülle eingeschlossen, einschliesslich der Steuerelektronik. Das Teleskop ist in der Lage, der bewegten Lichtquelle vollautomatisch zu folgen, dies auch bei moderater Bewegung des Untergrundes. Bei der Spektromereinheit handelt es sich um einen Quasi-Monochromator mit einem Echelle-Gitter als Hauptdispersionselement, was eine kompakte Bauweise bei gleichzeitig hoher spektraler Auflösung und Lichtstärke erlaubt. Mithilfe eines rückseitig beleuchteten CCD-Sensors können hochaufgelöste Aufnahmen von Wasserdampf-Absorptionslinien erfasst werden. Der primäre Wellenlängenbereich liegt zwischen 789 und 802 nm, die reziproke Lineardispersion beträgt 7.3 pm/px bei einer Brennweite von nur 400 mm. Ein motorisierter Umlenkspiegel im Spektrometer ermöglicht zusätzlich das Anfahren benachbarter Wellenlängenregionen, sowie die hochpräzise Positionsstabilisierung des Spektrums auf dem Detektor.

Testmessungen mit der Sonne und dem Mond als Hintergrundstrahler zeigen die ausserordentliche Lichtstärke des Systems. Jedoch verwehren beleuchtungsabhängige Interferenzstrukturen (Etaloning) auf dem Detektor das Generieren von auswertbaren Transmissionsspektren aus den Messdaten. Unter diesem Aspekt wurde die Eignung verschiedener optischer Verfahren zur Homogenisierung der ins Spektrometer eingeleiteten Strahlung bezüglich Feld und Apertur untersucht. Als Lösung mit hinreichend guter Strahlungsumverteilung bei gleichzeitig hinnehmbarer Intensitätsreduktion hat sich der Einsatz von kurzen Quarzlichtleitfasern mit hexagonalem Querschnitt erwiesen.

Hinsichtlich des Messbetriebes wurde ein Softwarepaket entwickelt, welches den Messablauf inklusive der zahlreichen Kalibrationsvorgänge autonom steuert und das Zusammenspiel der verschiedenen Sensoren und Aktuatoren koordiniert. Es wurden zudem verschiedene Algorithmen entwickelt, welche der

---

Eliminierung von Fehleinflüssen in den Rohmessdaten dienen, wie die Korrektur von Streu- und Falschlicht oder Algorithmen zur Korrektur von eingestreuten Schwebungsstrukturen im Spektrenbild. Ebenso wurden Verfahren bereitgestellt, welche zur Weiterverarbeitung der erfassten Spektren dienen, wie für eine integrale Bestimmung der Intensitätsbasislinie oder die dynamische Bestimmung von Apparateprofilen. Für die Ermittlung der Wasserdampfkonzentrationen aus den gemessenen spektroskopischen Daten konnte weitgehend auf bekannte Rechenverfahren zurückgegriffen werden.

Verschiedene verfügbare Spektraldatenbanken wurden hinsichtlich der Eignung der Daten ihrer Absorptionslinien zur zuverlässigen Bestimmung der Wasserdampfkonzentrationen analysiert. Vergleichsmessungen zwischen den beiden baugleichen Sonnenspektrometern zeigen erhebliche Abweichungen von bis zu  $1.5 \text{ kg/m}^2$  der zenitalen Integralkonzentrationen, welche aber hauptsächlich auf systematische Einflüsse zurückzuführen sind, wahrscheinlich in erster Linie verursacht durch noch unerkannten Streulichteinfluss. Der Mittelwert der stochastischen Abweichungen beträgt etwa 1.1 % der Slant PW Konzentration. Quervergleiche mit Daten, die durch GPS-Meteorologie erhoben wurden, zeigen ebenfalls deutliche Abweichungen und weisen auf verschiedene weitere systematischen Effekte hin, welche noch genauer untersucht werden müssen, beispielsweise die Genauigkeit der spektroskopischen Parameter aus der Literatur bezüglich Linienstärke und Linienverbreiterung, wie auch die Basislinienbestimmung in den gemessenen Spektren.

Trotz der deutlichen Empfindlichkeitseinbusse gegenüber dem ursprünglich geplanten Konzept konnte die Methodik dennoch auch erfolgreich auf Mondmessungen angewandt werden, wenngleich mit verminderter Genauigkeit, wie mittels stochastischer Abschätzungen dargelegt, und mit deutlich reduzierter zeitlicher Auflösung.

Das vorliegende Projekt bestätigt und verdeutlicht die Möglichkeiten der Anwendung von DOAS auf die bodengestützte Bestimmung von integralen Wasserdampfkonzentrationen, gibt aber auch klare Hinweise bezüglich der noch eingehender zu betrachtenden systematischen Einflüsse. Mit dieser Arbeit werden sowohl die Chancen, als auch die erheblichen Schwierigkeiten aufgezeigt, mit denen das Design, die Konstruktion und der Einsatz von hochintegrierten DOAS-Spektrometern hoher Leistungsfähigkeit verbunden ist. Bezüglich des Einsatzes von verschiedenen optischen Komponenten und Detektoren konnten für die Entwicklung ähnlicher Instrumente wertvolle Erkenntnisse gewonnen werden.